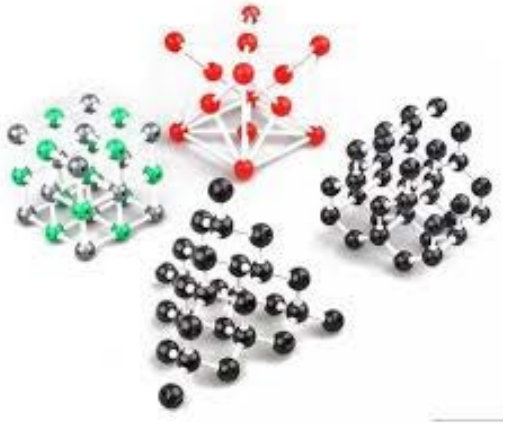
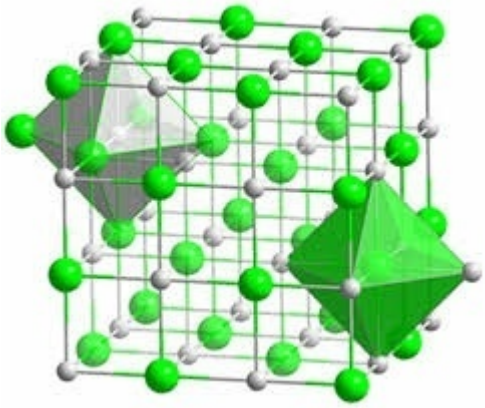




Travaux Pratiques

Modèles Cristallins

illustrés par le logiciel ChimGéné

Initiation au logiciel **ChimGéné**

Logiciel de visualisation ChimGéné

Ce logiciel présente plusieurs simulations

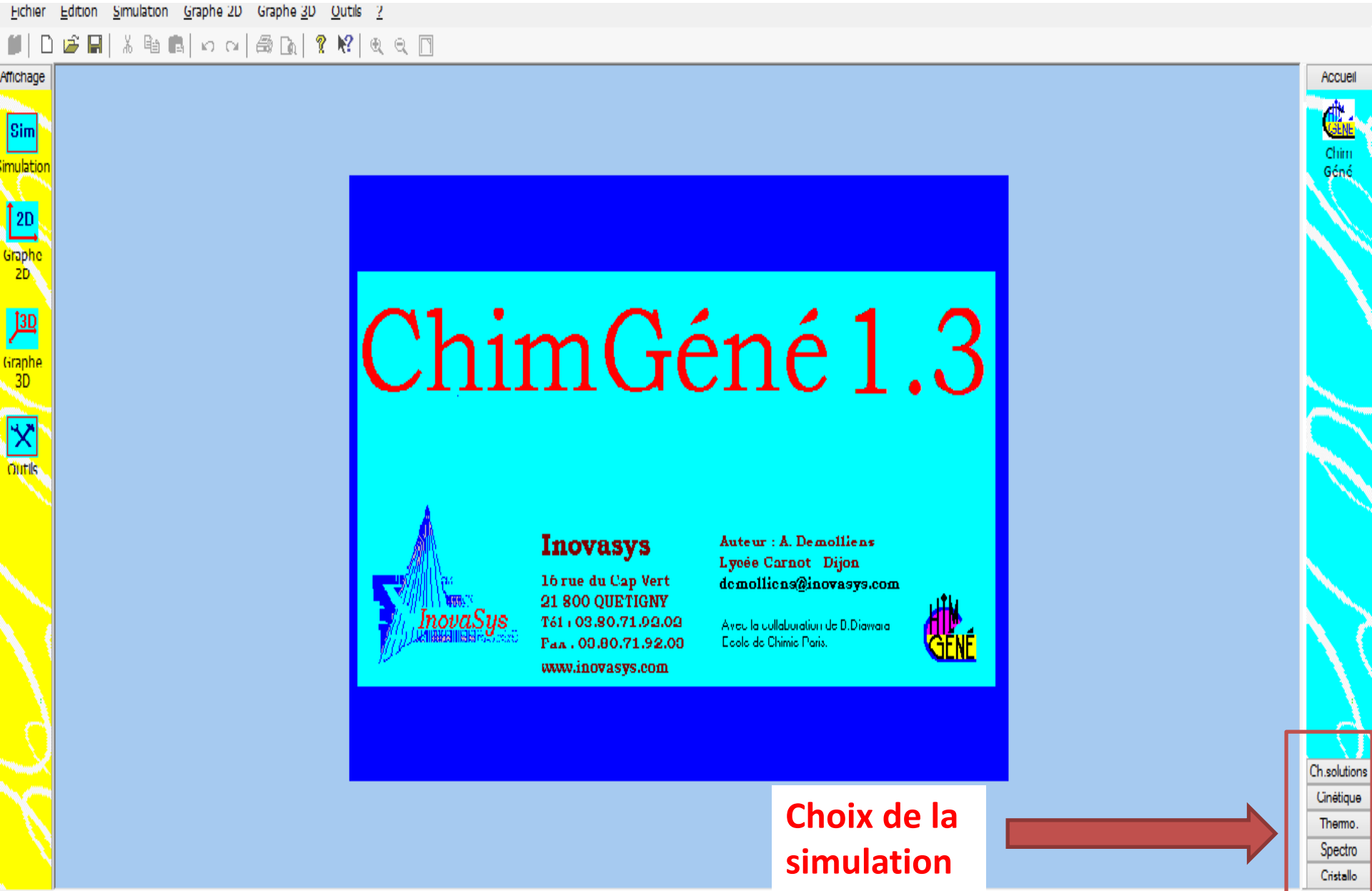
- *chimie des solutions,*
- *cinétique,*
- *thermodynamique,*
- *Spectroscopie*
- *cristallographie*

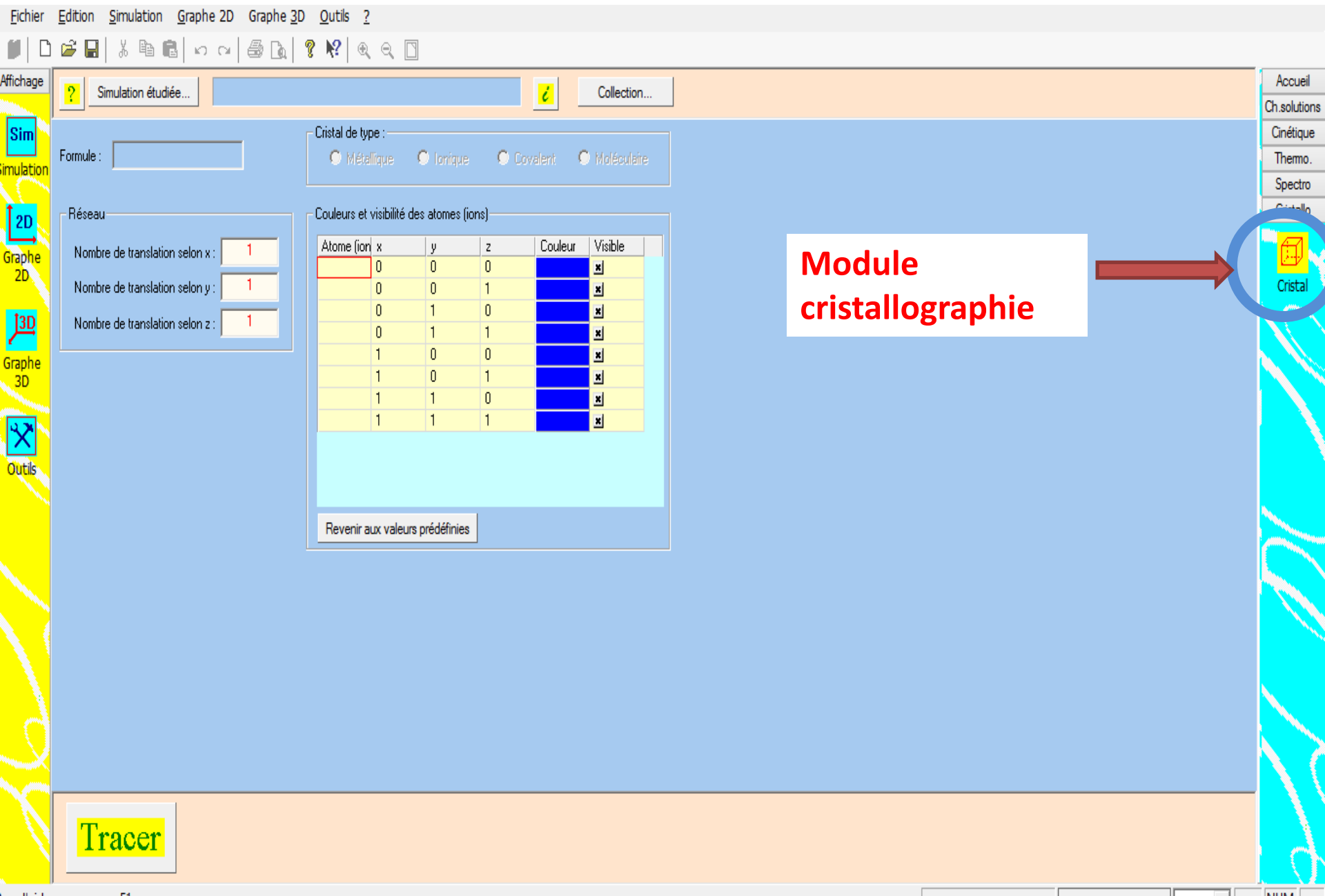
Logiciel de visualisation ChimGéné

Module Cristallographie

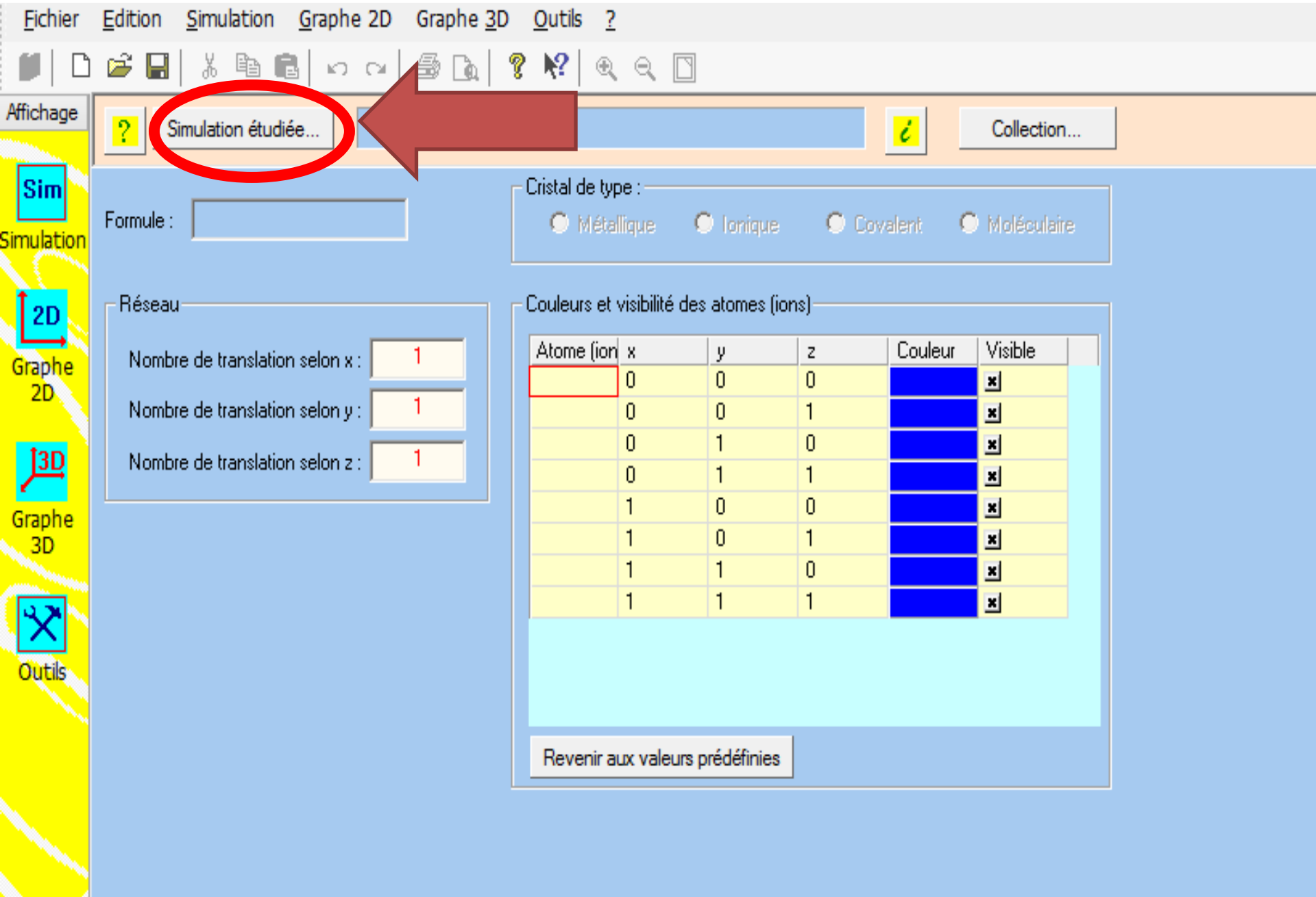
Ce logiciel permet, entre autre, de :

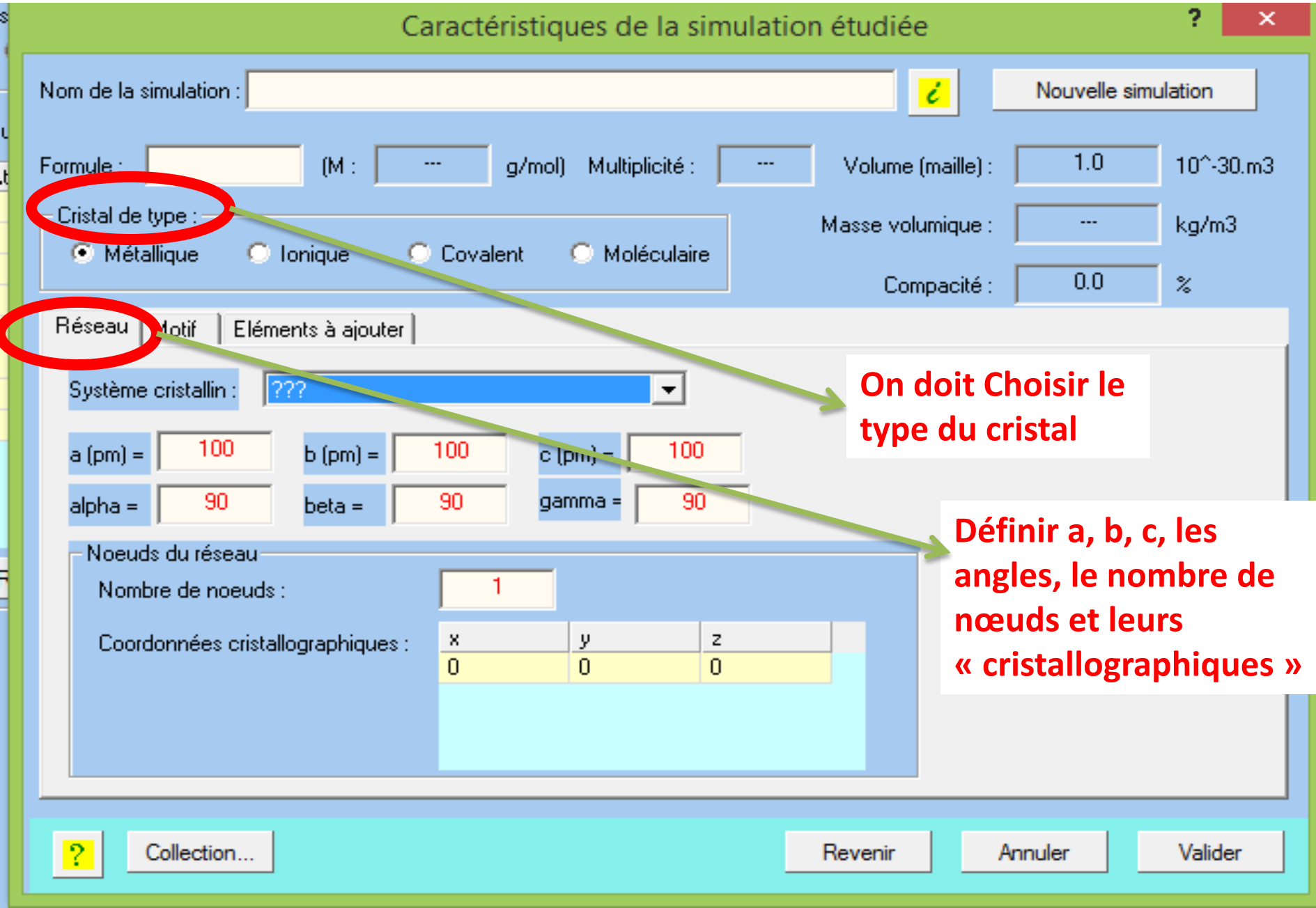
- *Visualiser les mailles cristallines,*
- *Etudier les sites interstitiels,*
- *Déterminer les paramètres géométriques...*


Fichier Edition Simulation Graphe 2D Graphe 3D Outils ?
Affichage
Sim
Simulation
2D
Graphe 2D
3D
Graphe 3D
Outils
Accueil
Chim Géné
ChimGéné 1.3
InovaSys
Inovasys
16 rue du Cap Vert
21 800 QUETIGNY
Tél : 03.80.71.92.02
Fax : 03.80.71.92.03
www.inovasys.com
Auteur : A. Demolliens
Lycée Carnot Dijon
demolliens@inovasys.com
Avec la collaboration de D.Diawara
Ecole de Chimie Paris.
GENE
Ch.solutions
Cinétique
Thermo.
Spectro
Cristallo
Choix de la simulation
Pour l'aide, appuyez sur F1
Accueil
Prof.
NUM

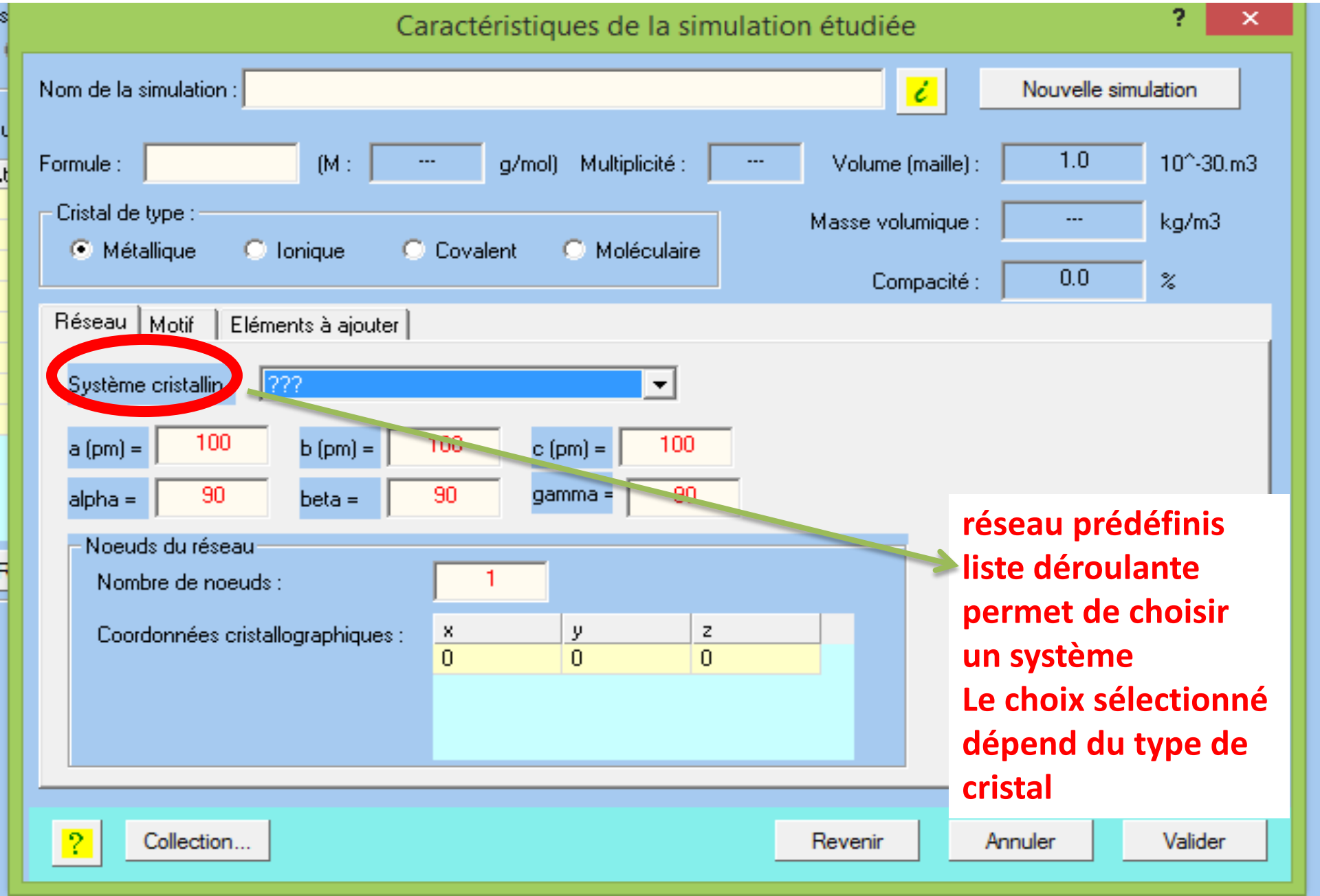


Module cristallographie


Fichier Edition Simulation Graphe 2D Graphe 3D Outils ?
Affichage
Simulation étudiée...
Collection...
Sim
Simulation
2D
Graphe 2D
3D
Graphe 3D
Outils
Formule :
Cristal de type :
Métallique
Ionique
Covalent
Moléculaire
Réseau
Nombre de translation selon x : 1
Nombre de translation selon y : 1
Nombre de translation selon z : 1
Couleurs et visibilité des atomes (ions)
Atome (ion x y z Couleur Visible
0 0 0
0 0 1
0 1 0
0 1 1
1 0 0
1 0 1
1 1 0
1 1 1
Revenir aux valeurs prédéfinies

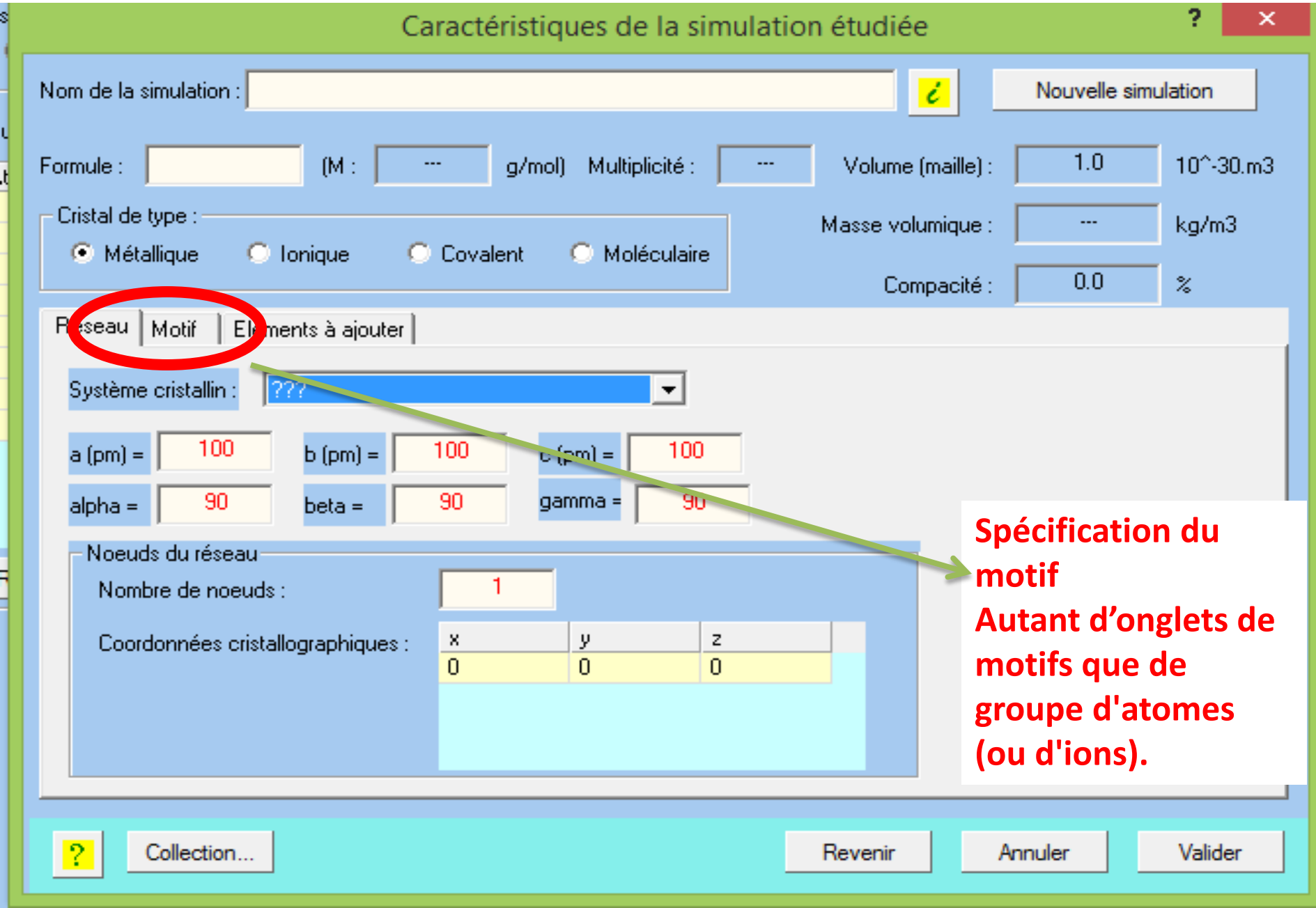

Caractéristiques de la simulation étudiée
Nom de la simulation :
Nouvelle simulation
Formule :
(M :
---
g/mol)
Multiplicité :

Volume (maille) :
1.0
10^-30.m3
Cristal de type :
Métallique
Ionique
Covalent
Moléculaire
Masse volumique :
---
kg/m3
Compacité :
0.0
%
Réseau
Motif
Eléments à ajouter
Système cristallin :
???
a (pm) =
100
b (pm) =
100
c (pm) =
100
alpha =
90
beta =
90
gamma =
90
Noeuds du réseau
Nombre de noeuds :
1
Coordonnées cristallographiques :
x
y
z
0
0
0
On doit Choisir le type du cristal
Définir a, b, c, les angles, le nombre de nœuds et leurs « cristallographiques »
Collection...
Revenir
Annuler
Valider

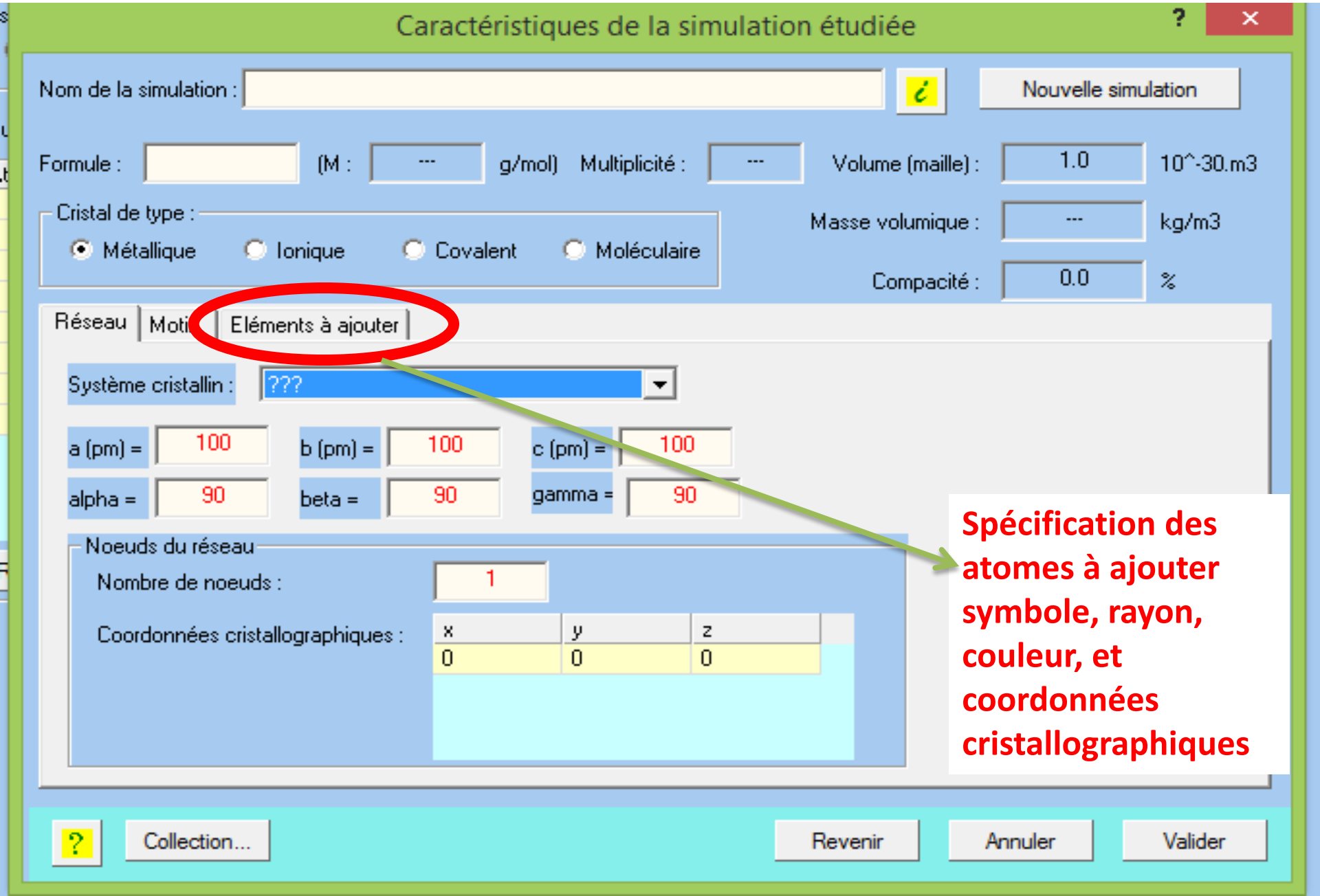

Caractéristiques de la simulation étudiée
Nom de la simulation :
Nouvelle simulation
Formule :
(M :
---
g/mol)
Multiplicité :

Volume (maille) :
1.0
10^-30.m3
Cristal de type :
Métallique
Ionique
Covalent
Moléculaire
Masse volumique :
---
kg/m3
Compacité :
0.0
%
Réseau
Motif
Eléments à ajouter
Système cristallin
???
a (pm) =
100
b (pm) =
100
c (pm) =
100
alpha =
90
beta =
90
gamma =
90
Noeuds du réseau
Nombre de noeuds :
1
Coordonnées cristallographiques :
x
y
z
0
0
0
réseau prédéfinis
liste déroulante
permet de choisir
un système
Le choix sélectionné
dépend du type de
cristal
Collection...
Revenir
Annuler
Valider

Cristal métallique | Cristal ionique | Cristal covalent | Cristal moléculaire


Caractéristiques de la simulation étudiée
Nom de la simulation :
Nouvelle simulation
Formule :
(M :
---
g/mol)
Multiplicité :

Volume (maille) :
1.0
10^-30.m3
Cristal de type :
Métallique
Ionique
Covalent
Moléculaire
Masse volumique :
---
kg/m3
Compacité :
0.0
%
Réseau
Motif
Eléments à ajouter
Système cristallin :
???
a (pm) =
100
b (pm) =
100
c (pm) =
100
alpha =
90
beta =
90
gamma =
90
Noeuds du réseau
Nombre de noeuds :
1
Coordonnées cristallographiques :
x
y
z
0
0
0
Spécification du motif
Autant d'onglets de motifs que de groupe d'atomes (ou d'ions).
Collection...
Revenir
Annuler
Valider


Caractéristiques de la simulation étudiée
Nom de la simulation :
Nouvelle simulation
Formule :
(M :
---
g/mol)
Multiplicité :

Volume (maille) :
1.0
10^-30.m3
Cristal de type :
Métallique
Ionique
Covalent
Moléculaire
Masse volumique :
---
kg/m3
Compacité :
0.0
%
Réseau
Moti
Eléments à ajouter
Système cristallin :
???
a (pm) =
100
b (pm) =
100
c (pm) =
100
alpha =
90
beta =
90
gamma =
90
Noeuds du réseau
Nombre de noeuds :
1
Coordonnées cristallographiques :
x
y
z
0
0
0
Spécification des atomes à ajouter symbole, rayon, couleur, et coordonnées cristallographiques
Collection...
Revenir
Annuler
Valider

Exemple NaCl

Simulation étudiée... | Modèle chlorure de sodium | Collection...

Formule : NaCl

Cristal de type : Métallique | Ionique | Covalent | Moléculaire

Réseau

Nombre de translation selon x : 1

Nombre de translation selon y : 1

Nombre de translation selon z : 1

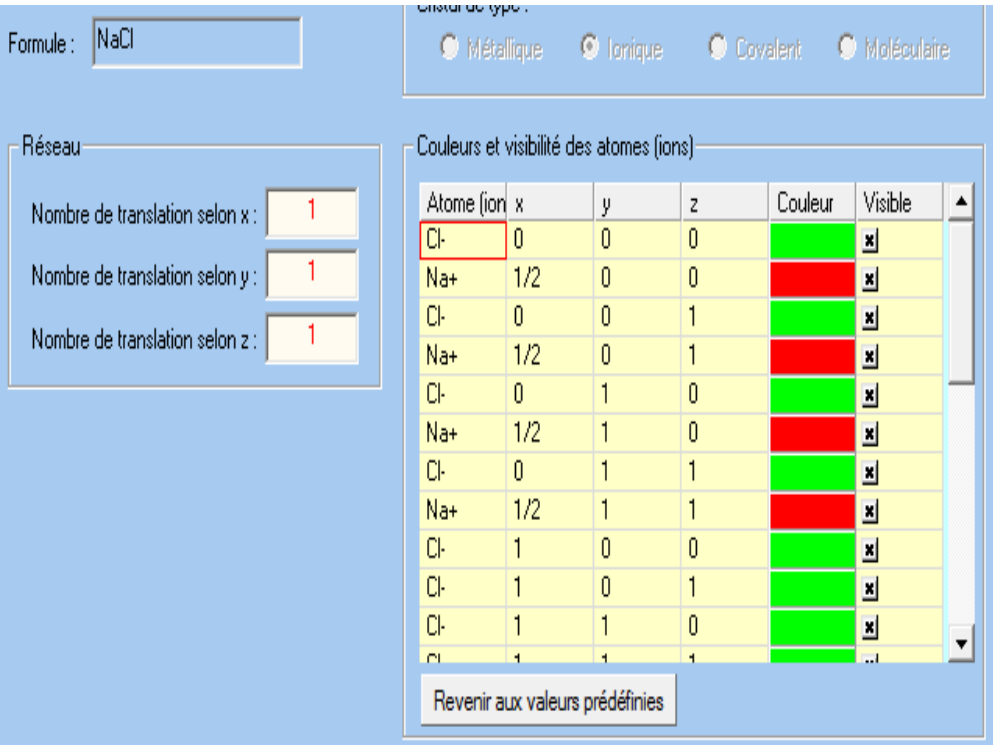
Couleurs et visibilité des atomes (ions)

Atome (ion	x	y	z	Couleur	Visible
Cl-	0	0	0		
Na+	1/2	0	0		
Cl-	0	0	1		
Na+	1/2	0			
Cl-	0	1	0		
Na+	1/2	1	0		
Cl-	0	1	1		
Na+	1/2	1	1		
Cl-	1	0			
Cl-	1	0			
Cl-	1	1			

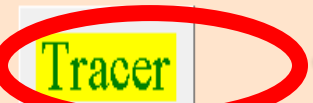
Revenir aux valeurs préc

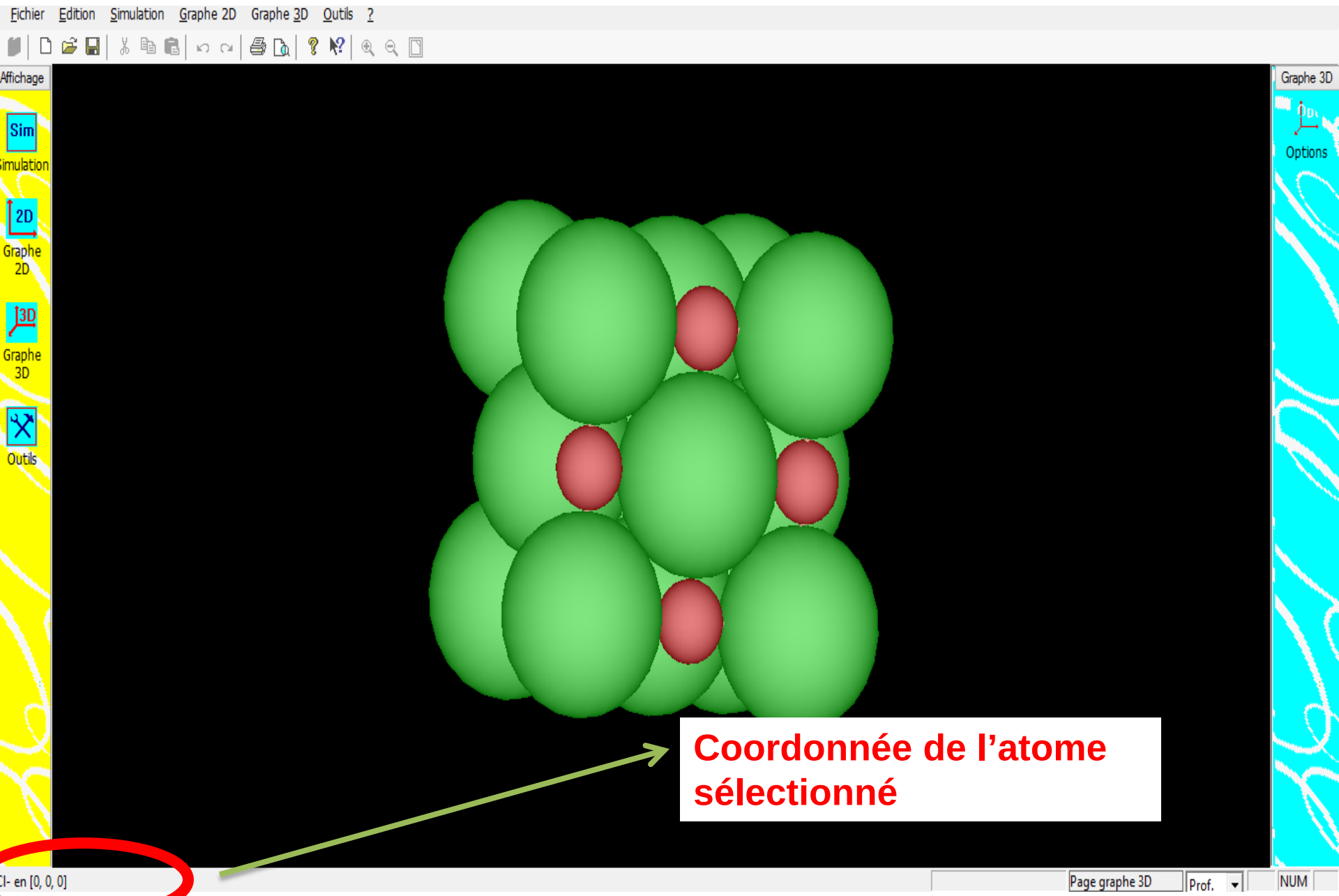
Translation que l'on doit appliquer au réseau le long des trois directions x, y et z.

liste des atomes
Leur couleur
Leurs positions
Coordonnées cartésiennes

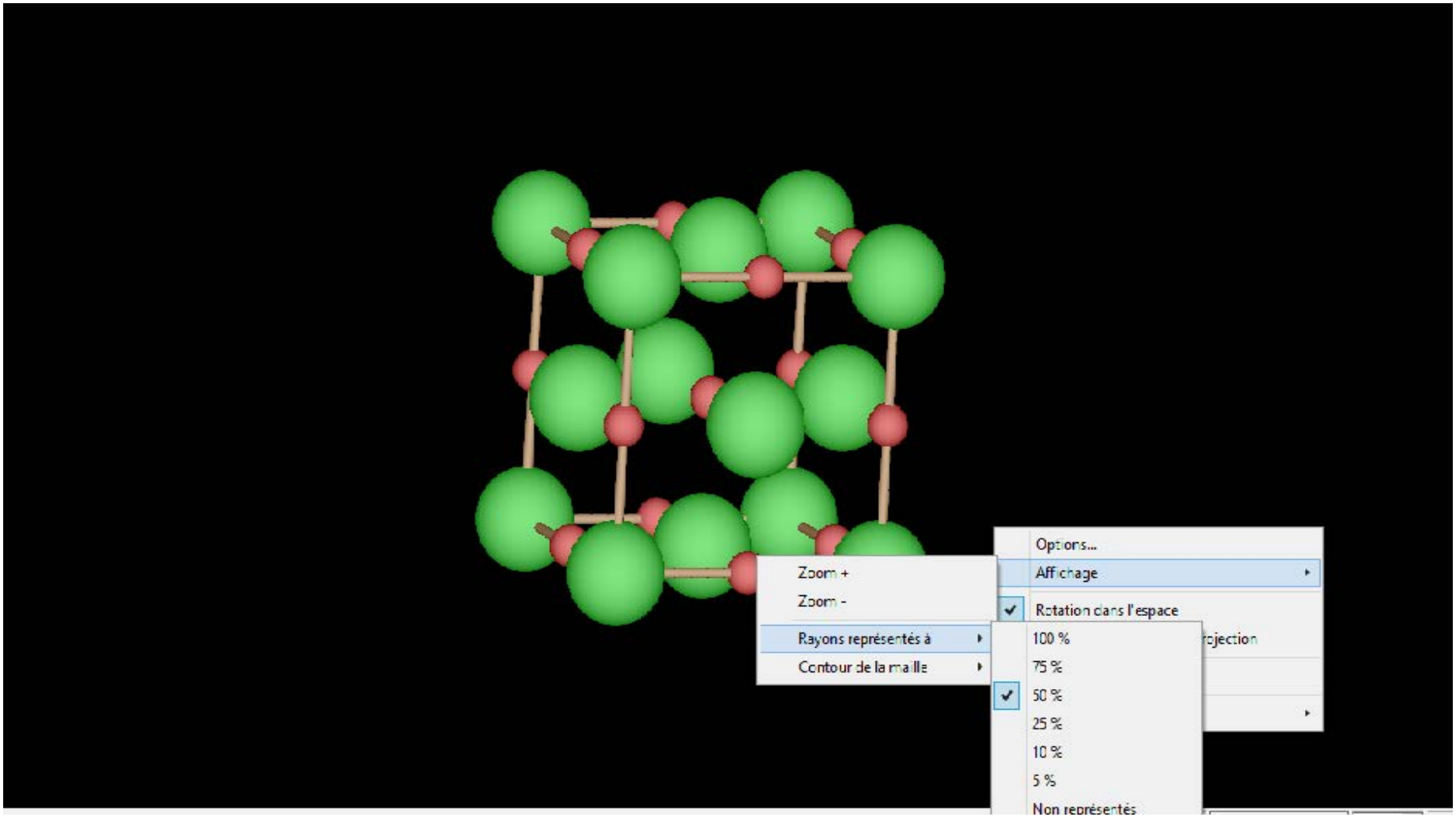


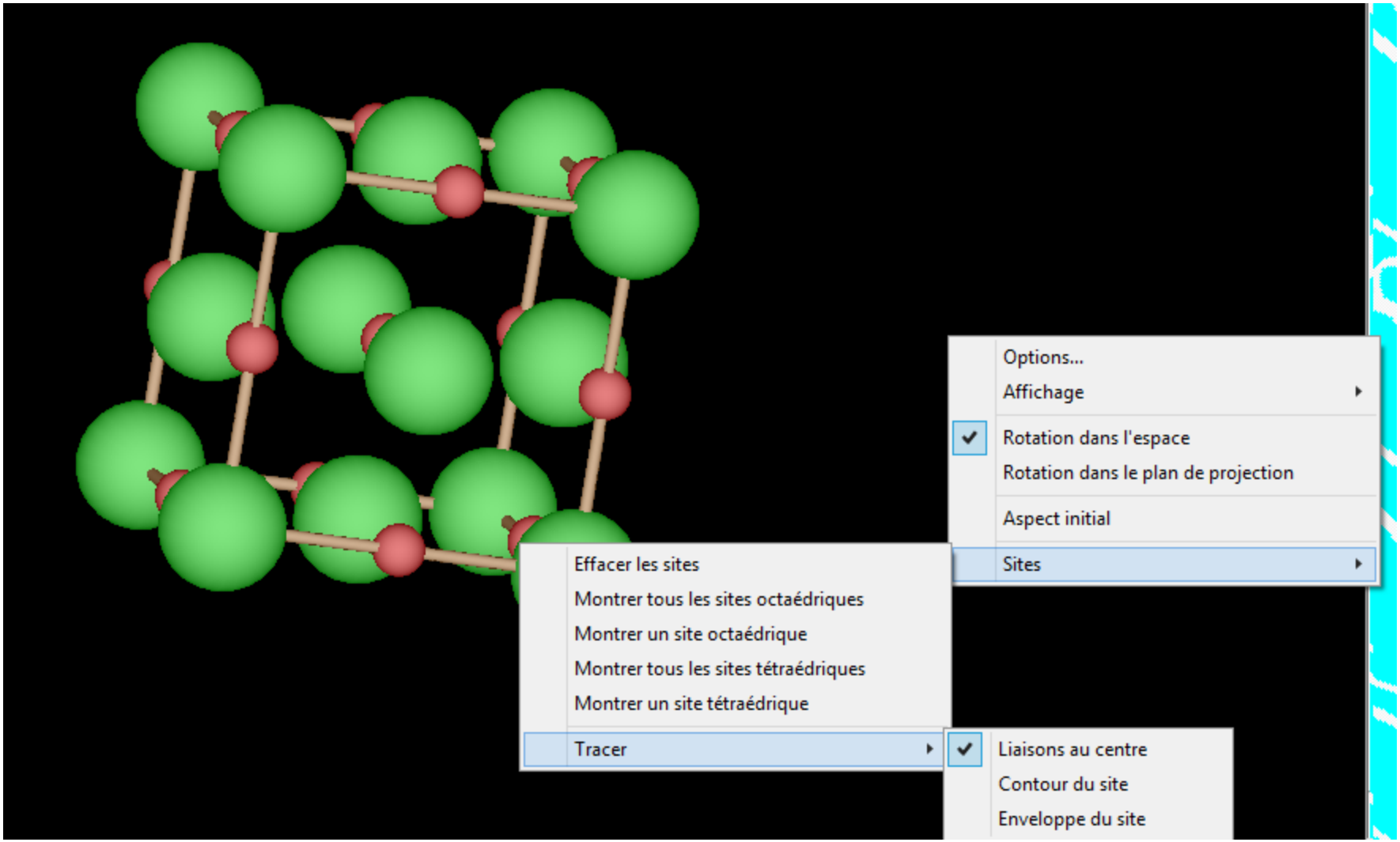
Représentation en 3D du cristal



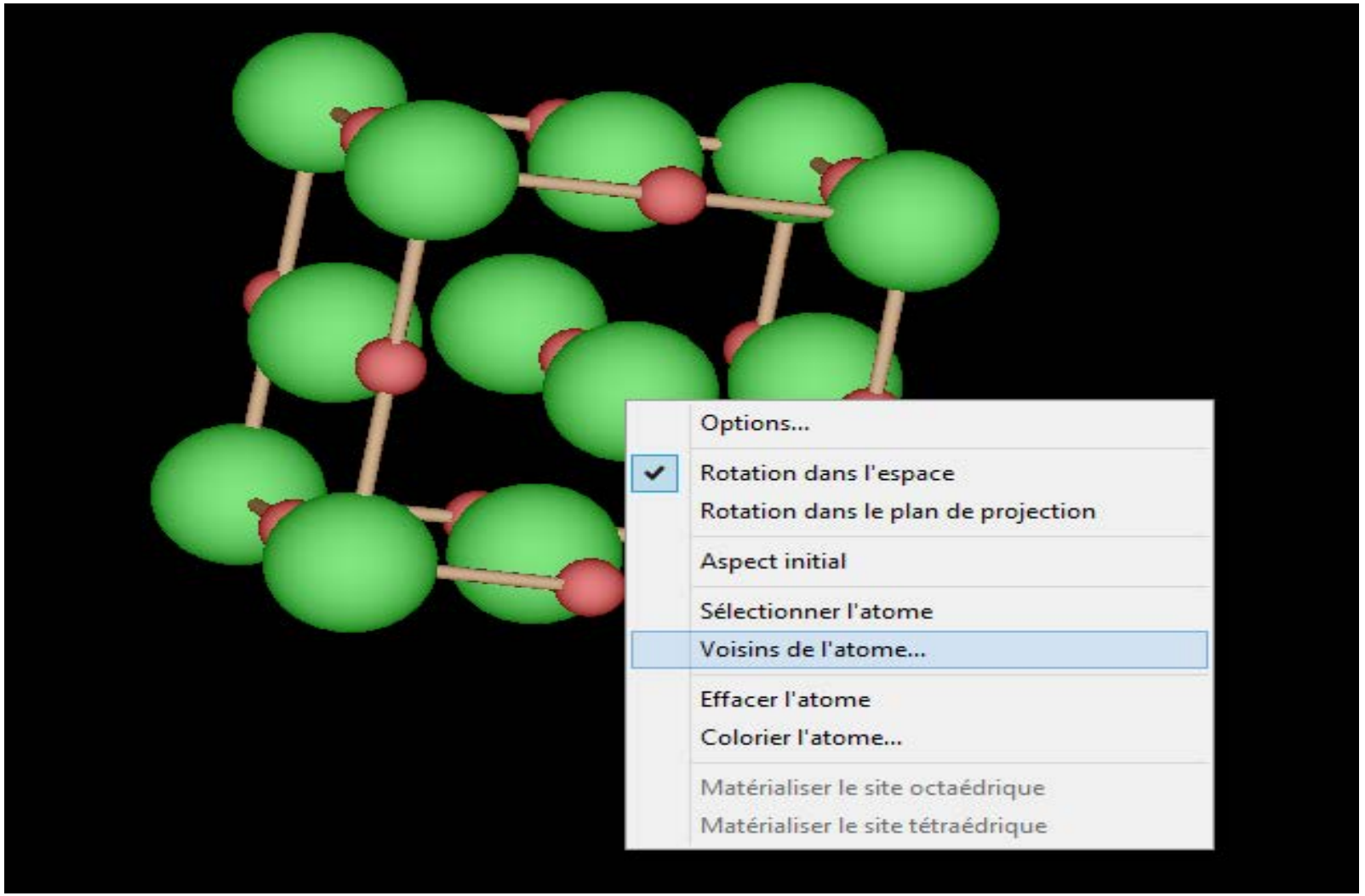

Fichier Edition Simulation Graphe 2D Graphe 3D Outils ?
Affichage
Sim
Simulation
2D
Graphe 2D
3D
Graphe 3D
Outils
Graphe 3D
Options
Coordonnée de l'atome sélectionné
Cl- en [0, 0, 0]
Page graphe 3D
Prof.
NUM

un clique sur le bouton droit dans la zone du graphe, fait apparaître une boîte de dialogue précisant les options d'affichage du cristal.

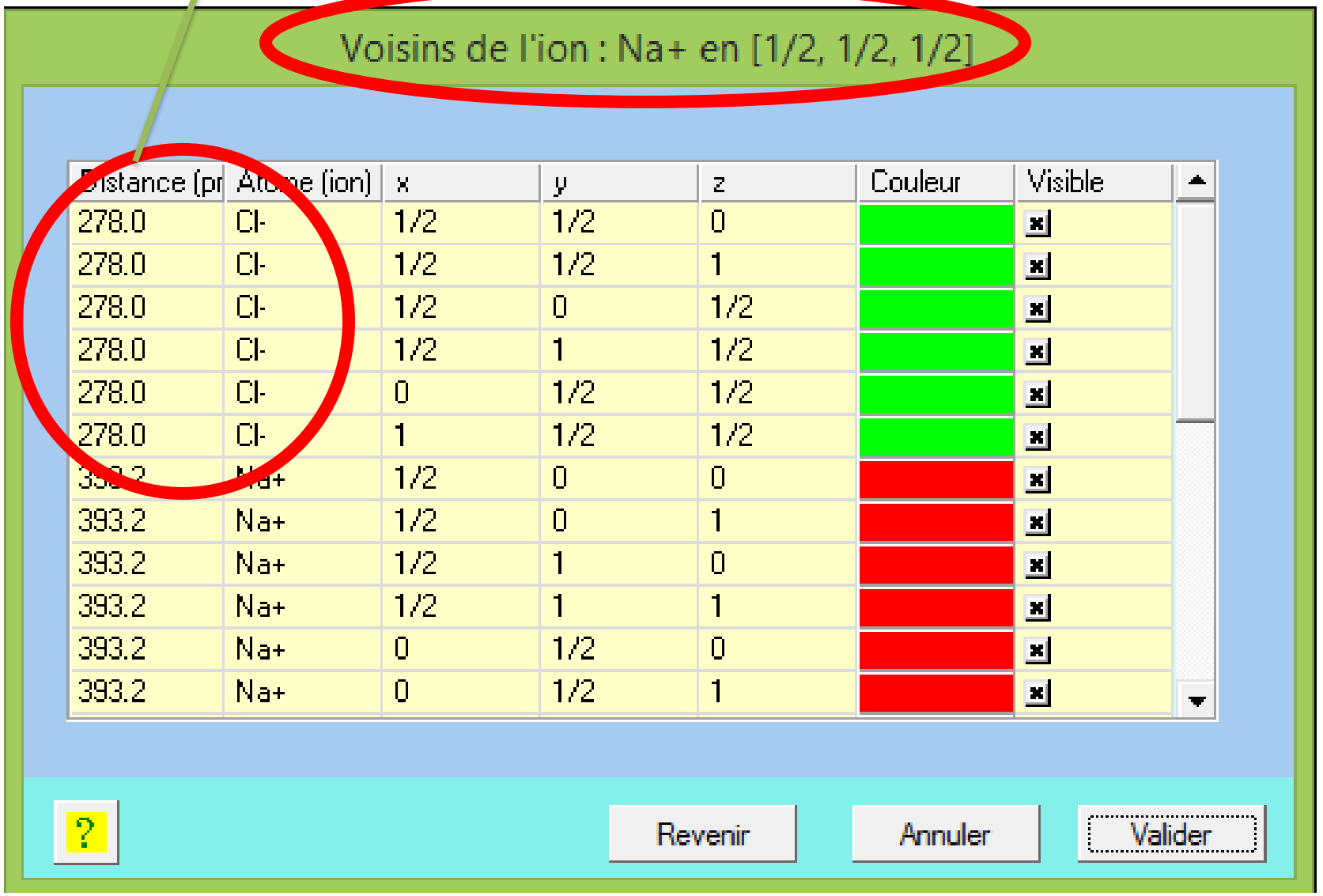



Options...
Affichage
Rotation dans l'espace
Rotation dans le plan de projection
Aspect initial
Sites
Effacer les sites
Montrer tous les sites octaédriques
Montrer un site octaédrique
Montrer tous les sites tétraédriques
Montrer un site tétraédrique
Tracer
Liaisons au centre
Contour du site
Enveloppe du site

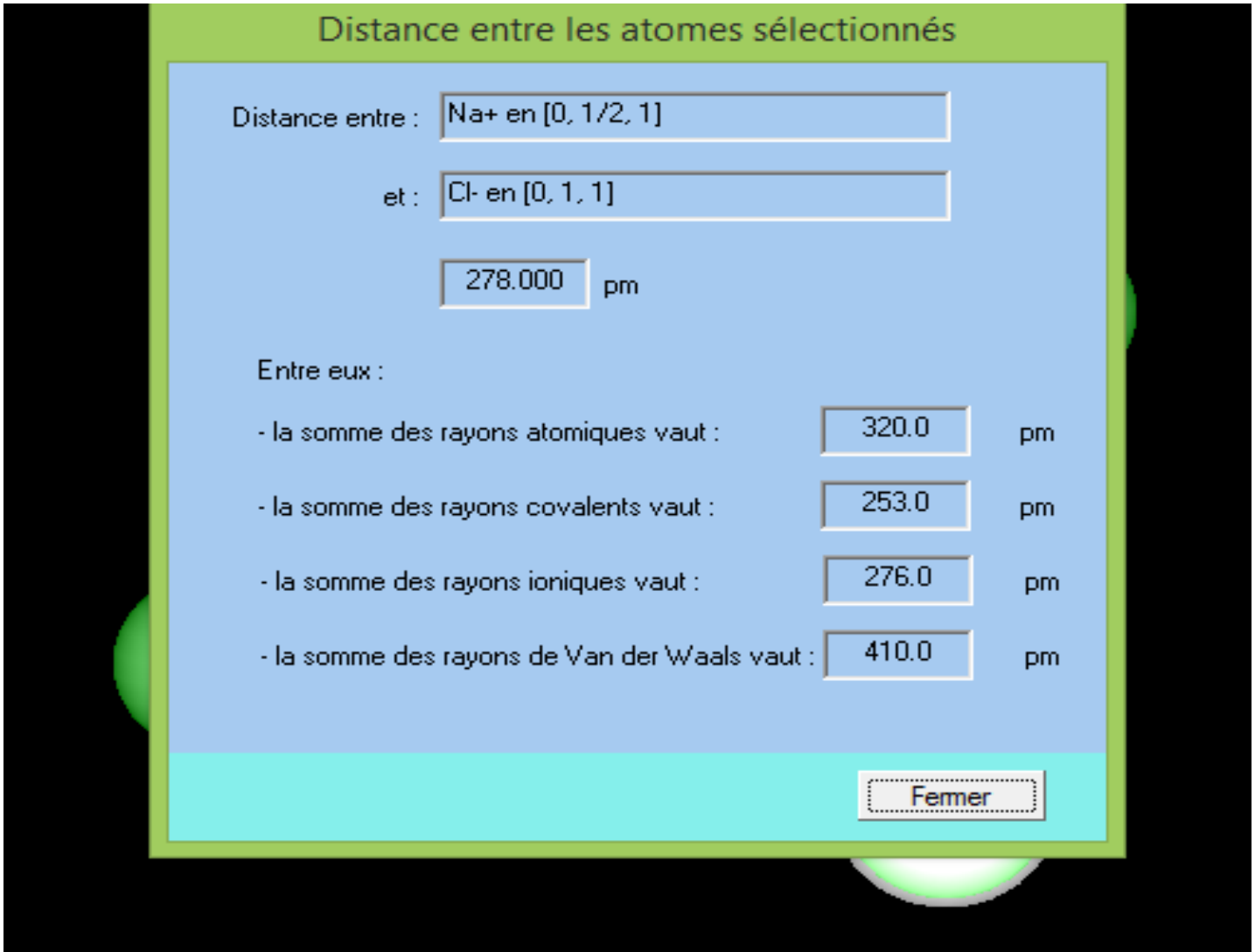
Boite de dialogue, si on a sélectionné un atome:
Exp: Voisins de l'atome



6 Cl- situés à la même distance



si on sélectionne deux atomes, on peut connaître la distance qui les sépare



Application

***A l'aide du logiciel ChimGéné** étudier des structures suivantes :*

ZnS(blende), CaF_2 et Zn hexagonale compact,

Pour toutes ses structures

- ***Dessiner les mailles élémentaires,***
- ***Calculer Z, C, ρ,***
- ***Projection de la maille sur le plan oxy***
- ***Coordonnées des ions et atomes***